



TITLE:

Hubbardモデルに見る強相関電子系のエッセンス(第52回物性若手夏の学校(2007年度),講義ノート)

AUTHOR(S):

武藤, 哲也

CITATION:

武藤, 哲也. Hubbardモデルに見る強相関電子系のエッセンス(第52回物性若手夏の学校(2007年度),講義ノート). 物性研究 2008, 89(6): 985-998

ISSUE DATE:

2008-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/111014>

RIGHT:

Hubbard モデルに見る強相関電子系のエッセンス

武藤 哲也

島根大学総合理工学部物質科学科

1 はじめに

強相関電子系と呼ばれる研究分野は、固体物性研究の大きな一領域を占めていて、銅酸化物高温超伝導体や有機超伝導体、重い電子系と呼ばれる物質群、鉄やニッケルなどの強磁性金属といった特徴的な物性を示す多くの物質が、その研究対象となっています。強相関電子系は、その名前にあるように、固体中の「電子」の「相関」効果が「強」い系ですが、そもそも、電子の相関効果とは何か、そして、それが強い系では何が興味深いのか、一言で説明しにくい上に、研究対象が広範囲に渡るため、研究の面白さのエッセンスが初学者にうまく伝わりません。

強相関電子系の多種多様な物質における諸物性を記述するのは、現在の最先端の研究の目的でもあり、容易ではありませんが、そのエッセンスは、強相関電子系の様々な研究に顔を出す Hubbard モデルと呼ばれる理論モデルに含まれています。本講義では、Hubbard モデルを通して、強相関電子系のエッセンスを、できるだけ平易に解説したいと思います。

2 タイトバインディングモデル

固体内の電子状態を記述するには、我々にとって「わかりやすい状態」を基本にする必要があります。「わかりやすい状態」というのは曖昧な表現ですが、敢えて言えば、「(波動関数が) 簡単に求められる状態」だと考えればよいでしょう。つまり、Schrödinger 方程式を近似に頼らずに解いて得られる状態です。

「わかりやすい状態」として、よく議論の出発点に用いられるのは、「自由な電子」と「原子内に束縛された電子」です [1, 2]。どちらも固体内の真の電子状態とは異なるはずですが、どちらかを基本に考えていけば、全くの手探りで考えるよりはわかりやすいでしょう。前者を基本にするのが、自由電子モデルに基づく考え方であり、後者を基本にするのが、(原子に) 強く束縛されたモデル、即ち、**タイトバインディングモデル** (tight-binding model) に基づく考え方です。

どちらの考え方でも、きちんと扱うことができれば、固体内の電子状態を的確に記述できるはずですが、「きちんと扱う」ことが難しいため、どちらの考え方で記述すべき

かという「適性診断」が必要になります。強相関電子系と呼ばれる研究分野の対象は、1章にも挙げたとおり、多岐にわたるわけですが、その多くの物質において、不完全殻を持つイオン（磁性イオン）が特異な物性の起源となっているので¹，磁性イオンにおける電子の「適性」を考える必要があります。

磁性イオンにおける電子の波動関数の特徴などの詳細は他の書物に譲ることにして[3]，結論だけ言えば、「適性診断」によると，強相関電子系での電子状態については，タイトバインディングモデルによる記述が適していると考えられています。むしろ，タイトバインディングモデルによる記述が適しているような系では，電子相関が重要になることが多いと言いきかかもしれません。

位置 \mathbf{R} の原子に束縛された軌道を $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ と表して，異なる原子の軌道は互いに直交すること

$$\int \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} = \delta_{ij} \quad (1)$$

を仮定しておきます²。これら $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ の線形結合を用いて Bloch 関数を構成してみましょう。

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (2)$$

ここで N は原子の総数です。波数 \mathbf{k} の電子の運動エネルギー $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ は，この Bloch 関数による（一体の）ハミルトニアン \mathcal{H} の期待値として求められます。

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \mathcal{H} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

異なる原子間の軌道によるハミルトニアンの期待値を，

$$t_{ij} = \int \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \mathcal{H} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}$$

で定義すれば， $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ は，

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{ij} \quad (3)$$

と表すことができます。 t_{ij} を跳び移り積分（transfer integral）と呼ぶことがありますが，タイトバインディングモデルでは，この跳び移り積分を定義することで，バンドのエネルギー分散（つまり $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ ）が決定されることになります。たとえば，格子定数 a の単純正方格子上で，最近接格子点間にのみ跳び移り積分を定義して，それを $-t$ とおけば，エネルギー

¹ 強相関電子系の研究対象となる物質群全てが必ずしも磁性イオンを含んでいるわけではない。

² 簡単のため，本講義では，軌道の縮退がない場合を考える（s 軌道のみを考えることに相当する）。

ギ一分散は、波数 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ に対して、

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t\{\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\}$$

と表されることが容易にわかります³。下図は、単純正方格子上のタイトバインディングモデルにおける、第一 Brillouin ゾーン内のエネルギー分散の立体図です（横軸を k_x 、縦軸を k_y 、高さ軸を $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ と考えて下さい）。個々の電子の状態は波数 \mathbf{k} で指定されるので、エネルギー分散が決定すれば、系の電子状態が求められることになります。

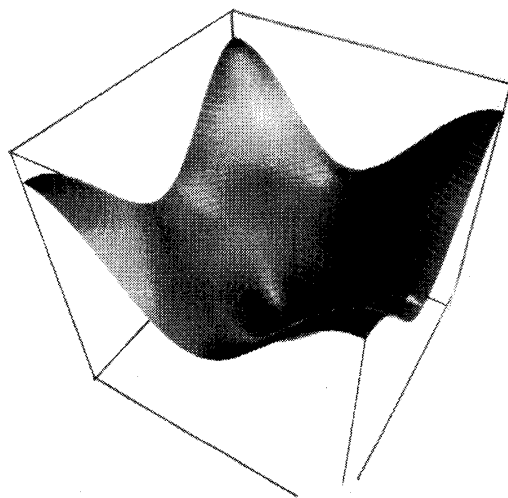


Figure 1: 単純正方格子上のタイトバインディングモデルのエネルギー分散

3 Hubbard モデル

タイトバインディングモデルで記述するのが適切であるような系では、「原子に束縛された電子」をよい出発点と考えるわけですから、電子軌道の広がりも、原子の周囲の非常に狭い範囲に限られていると考えます⁴。2章では、電子間の斥力を考えていませんでしたが、「非常に狭い範囲」に制限された軌道にある電子は、互いに強い Coulomb 斥力を感じるはずで、もちろん、離れた電子どうしにも Coulomb 斥力が働くわけですが、簡単のため、同じ原子内の電子間（今の場合、s 軌道のみを考えているので、同じ原子内の同じ軌道内の電子間）にのみ、Coulomb 斥力が働くと仮定します⁵。二つの電子が（同じ

³ 教科書などに「容易に」と書いてある時は、必ず自分で確認したほうがよい。なぜなら、往々にして導出が容易でないことがあるから。もちろん、今の場合は、真の意味で容易である。

⁴ 本来は、非常に狭い範囲に限られていると考えているからこそ、タイトバインディングモデルの適用が可能なのだと考えるべきである。

⁵ この簡単化の妥当性を論じることも重要である [3, 4]。

原子上の) 同じ軌道上にある時に働く Coulomb 相互作用エネルギーを次の U で定義しましょう;

$$U = \iint \phi^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}) \phi^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

この U と, 2章の t_{ij} を用いると, タイトバインディングモデルで記述される最も簡単な「相互作用する電子系」の理論モデルを構成することができます.

以降では, 第二量子化の表式を用いますが, 軌道 $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ にスピン σ の電子を生成する演算子を $c_{i\sigma}^\dagger$, 軌道 $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ のスピン σ の電子を消滅させる演算子を $c_{i\sigma}$ と書くと, 系のハミルトニアンは, 次のようになります (数演算子を $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ で定義します);

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (4)$$

ここで, $\langle i, j \rangle$ は i と j の組にわたる和を表し, H.c. は直前の項のエルミート共役項を表します. 各々の演算子は, 式 (1) から, Fermi 演算子の反交換関係

$$\begin{aligned} \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \\ \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} &= \{c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger\} = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

を満たします.

消滅 (生成) 演算子 $c_{i\sigma}^{(\dagger)}$ は, 「位置 \mathbf{R}_i にある原子の軌道内のスピン σ の電子」に対する演算子ですが, 今の場合, 電子軌道は原子内でしか定義されていませんし, s 軌道しか考えていないので, 便宜的に「格子点 (サイト) i のスピン σ の電子」と表現することが許されます. 式 (4) の第一項は, 格子点 j の電子を消滅させて, 格子点 i の電子を生成させるわけですから (H.c. の項はその逆), タイトバインディングモデルで表された電子の, 格子点 j から i への跳び移り (H.c. の項はその逆) を表し, 運動エネルギーに対応する項であることがわかります. 式 (4) の第二項は, 同じ原子上の \uparrow スピンの電子と \downarrow スピンの電子間に働く斥力を表しますが, 同じスピンの電子間に斥力が働かない理由は, 今の場合, s 軌道のみを考えているからです (Pauli の排他原理). このハミルトニアンで記述されるモデルは, (広義の) **Hubbard モデル**と呼ばれています⁶.

Hubbard モデルのハミルトニアン 式 (4) の第一項は運動エネルギーに対応しますから, 実空間のサイト表示から, 波数空間での表示に Fourier 変換したほうがわかりやすいかもしれません. 式 (2) で表される軌道のスピン σ の電子の生成・消滅演算子

$$c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{i\sigma}^\dagger, \quad c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{i\sigma}$$

⁶ モデルの起源は Hubbard[18] 以前に遡るようだが [3], 筆者は, 不勉強ゆえに, 本当の起源を知らない.

を用いれば⁷，式(3)に注意して，運動エネルギーの項（第一項）が次のように表せることがわかります；

$$\text{式(4) 第一項} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (6)$$

波数の和は第一 Brillouin ゾーン内にわたります。

式(4)の Hubbard ハミルトニアンを，式(6)を用いて，次のように表現することができます；

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (7)$$

この表現は，一つのハミルトニアンの中にサイト表示と波数表示が「同居」する違和感がありますが，Hubbard モデルの本質を如実に表しています。第一項と第二項は，波数表示とサイト表示という異なる表示で表したほうが，それぞれの示す物理的な内容を表現し易くなっています。それぞれの項の特徴を，以下で見てください [4]。

もし，第二項がなくて，第一項だけの場合，系はどのように記述されるでしょうか。第一項は，「電子の運動エネルギー $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ 」 \times 「波数 \mathbf{k} ，スピン σ の電子の数演算子： $n_{\mathbf{k}\sigma} = c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}$ 」と表されていますから，「運動エネルギー $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ を持つ電子が $n_{\mathbf{k}\sigma}$ 個ある」という状態を記述することになります。ですから，第一項のみの場合の基底状態は，式(3)で表されるエネルギー分散に従って， \uparrow スピンと \downarrow スピンの電子をエネルギーの低い状態から順番に詰めていくことで得られることになります⁸。この時，ほとんどの電子が，そのスピンのモーメントを打ち消すように詰まっていくことに注意して下さい。また，波数 \mathbf{k} で指標付けされる状態の数は，結晶内の単位胞の数ですから，単位胞当たりの電子数が奇数個の場合は，どのようなバンド（エネルギー分散）の形であっても，必ず，バンドは部分的に占有されるので，系の基底状態は金属状態，即ち，導体となることになります。第一項だけの場合には，波数で考えるのがわかりやすい状態ですから，電子の波動としての性質，つまり，格子点に束縛されるのではなく，電子が系全体に広がろうとする性質が現れていると言ってもよいでしょう。

一方，第一項がなくて，第二項だけだったらどうでしょうか。第二項は，同じサイトが二つの電子に占有された時に U だけエネルギーが上がることを表しています。たとえば，全電子数を N_e とおくと， N_e が N に等しい時，即ち，格子点当たりの電子数密度 $n_e = N_e/N$ が 1 の時⁹ は，同じ格子点を二つの電子が占有するとエネルギーが上がってし

⁷ もちろん，式(5)を用いれば，これらの演算子にも式(5)と同様の反交換関係が成り立つことがわかる。

⁸ Fermi 縮退状態。

⁹ 特に，ハーフフィリング (half filling) と呼ばれる。

まうので、基底状態は、各格子点が一つの電子に占有された状態となります。第一項がないので、このような状態では、電子の移動は起こりませんから、系は絶縁体となります。また、各格子点における電子の持つスピンは完全に独立になるので、系は 2^N 重の縮退を持ちます。第二項だけの場合には、電子は系全体に広がるどころか、各格子点に束縛されることになり、電子の粒子としての性質が顔を出すことになるわけです。

以上からわかるように、式 (7) で表される Hubbard モデルは、量子力学でいう二重性 (duality) の二つの性質：波動性と粒子性を、第一項と第二項に含んだモデルになっています。しかも、不確定性原理を考えると、前者が顕著になれば後者は陰に隠れ、後者が表に出れば前者が裏に回る……というように、両者は互いに「牽制し合う関係」にありますから、状況によってどちらが表舞台に立つのか、自明ではないのです。このような関係を競合関係と呼びますが、物理に競合する要素がある時は、往々にして、(自明でないという意味で) 興味深い現象が現れます。また、その物理現象を記述することも難しくなります。

実は、Hubbard モデルも、式 (7) の第一項と第二項の競合による、興味深い物理を内在しています。Hubbard モデルにおいては、第一項と第二項の競合を、**遍歴** (itinerant) 性と**局在** (local) 性の競合ということがあります。Hubbard モデルは、その内在する物理の豊かさにより、多くの特異な物性の理論モデルとして用いられ、その解析の数学的困難さにより、単純なモデルにもかかわらず、現在でも研究の対象となっているのです。

4 Mott 絶縁体

ここまで、電子相関という言葉については触れてきませんでした。一言で言えば、一体近似では記述できない効果のことです。バンド理論は一体近似理論の典型ですが、基本的には、ある電子に着目して、陽イオンからの引力や周囲の電子からの斥力の効果を、その電子が感じる平均化された一体ポテンシャルで近似します。一体ポテンシャル中での電子状態から、改めて平均化されたポテンシャルを計算して、全体として自己無撞着に電子状態を構成するわけですが、こうして決められた電子状態は、最終的には、式 (6) の形に表されることになります。つまり、一体近似で記述できることとは、エネルギー分散の形 (バンド構造) のみから理解できることです。では、一体近似で記述できないこととはどのようなことでしょうか？

一体近似理論であるバンド理論は、物質の電気伝導に関して、導体と絶縁体の区別がある理由を明確に示してくれました。3章にも書いたように、単位胞当たりの電子数が奇

数個の場合は、エネルギー分散の形によらず、系は導体となり、偶数個の場合には、バンドが完全に占有されれば、系は絶縁体となります。このように、バンド理論による明快な導体と絶縁体の区別ですが、実は、バンド理論では理解できない絶縁体が存在するのです。

たとえば、 MnO という遷移金属酸化物を考えましょう。 Mn の電子数は 25、 O の電子数は 8 ですから、単位胞当たりの電子数は 33 です。奇数個の場合、バンドが完全に占有されることはあり得ませんから、バンド理論から考えれば、 MnO は導体であるはずですが、実際には、 MnO は絶縁体なのです¹⁰。つまり、 MnO の電気伝導に関しては、一体近似理論 (バンド理論) では正しく記述できないことになります。

MnO に限らず、多くの遷移金属酸化物で、バンド理論と現実との「不一致」が見られるのですが、これらの電気伝導を議論するためには、一体近似では不十分、即ち、電子相関が重要であるという指摘が 1930 年代にありました。この指摘を受けて、電子の運動エネルギーと電子間の斥力エネルギーの競合が系の伝導状態を左右するという系統的な研究をしたのが N. F. Mott です¹¹。彼にちなんで、(バンド理論に基づく限り金属だと予想されるにもかかわらず) 電子相関によって絶縁体となっている物質を、広く、**Mott 絶縁体**と呼んでいます。彼は、本質的に式 (4) で表されるような単純な系 (いわば固体水素) を考えて、 t_{ij} が U に比べて十分大きければ、系は金属的になり、逆に、十分小さければ、系は絶縁体となるという、 t_{ij} と U の比を変化させた時の金属-絶縁体転移を議論しました [6]。この転移を (広義の) **Mott 転移**と呼びます¹²。

実際、Hubbard モデルに対して動的平均場理論 (dynamical mean-field theory: DMFT) [7] と呼ばれる手法を適用した研究によると [8]、バンド幅 (式 (4) の t_{ij} に対応) に比べて U が小さい場合には金属的で、 U が大きい場合に絶縁体的になり、 U がバンド幅の 2 倍程度の値となる時に両者の転移、即ち、Mott 転移があることがわかりました¹³。

Mott 絶縁体は、バンド理論という一体近似理論では金属となるべきところが、実際には絶縁体となっている物質ですから、電子相関効果が顕著に現れた系です。つまり、Mott 絶縁体は、1 章で挙げた、「電子」の「相関」効果が「強」い系 — 強相関電子系の典型例だと言えるでしょう。

¹⁰ 電気伝導度から見積もられた活性化エネルギーは 0.74eV もあるとのこと [6]。

¹¹ 1977 年にノーベル物理学賞を受賞。

¹² 実際は、理想的な固体水素を考えて、格子構造を変えないまま、格子定数だけを変化させた時に、格子定数が小さい時には金属状態が、大きい時には絶縁体状態が、それぞれ実現することを示唆した。

¹³ これ以前にも転移の存在を議論した研究はあるが、この研究で初めて、基底状態において金属相も絶縁相も不備なく記述されたことは特記すべきである。ただし、この手法による Mott 転移の記述の妥当性にも注意が必要である。

5 強相関電子系の面白さ

Mott 転移は強相関電子系の典型的な現象ですが、本章では、Hubbard モデルで記述されると考えられる他の現象を挙げながら、強相関電子系の面白さを紹介しましょう¹⁴。

5.1 反強磁性絶縁体

4 章の素朴な Mott 転移の議論では、電子の持つスピンについては特に言及していませんでした。3 章で考察したとおり、電子数密度がハーフフィリングの時、式 (7) の第二項のみを考えると、系には 2^N 重の縮退がありました。これは、第一項のみの時の Fermi 縮退状態でスピンのモーメントが打ち消されたことと対照的です。基本的に第一項のみで記述されるバンド絶縁体ではスピンの自由度は顔を出しませんが、第二項の効果で実現している Mott 絶縁体ではスピンの自由度が「生きて」いるのです。

Mott 絶縁体では、式 (7) の第二項のみの時の 2^N 重の縮退は、電子の運動（第一項に対応する）により解けるはずですが、その時、系の磁氣的性質（磁性）はどのようなかを考えてみましょう。Mott 絶縁体では、 U の効果で電子が互いに避け合い、各々が一つずつ格子点を占有しますが、各格子点を占有した電子は、そのスピン自由度についても無関心ではられません。第一項があるため、運動エネルギーの利得があるような、「適切な」スピン配置を選ぶ必要があります。

簡単のため、2 章の中で例に挙げた、正方格子上の最近接格子点間のみに跳び移り積分を定義したモデルを考えましょう。電子は各格子点を一つずつ占有していますが、運動エネルギーの利得を求めて、少しでも動きたがっているはずです。しかし、ある格子点の電子について、周囲の四つの最近接格子点の電子のスピンが、全てその電子のスピンと同方向だったらどうなるでしょう。いくら電子が動きたがっても、一つの状態は一つの電子しか占有できないという Pauli の排他原理のために、その電子は、どの最近接格子点にも跳び移ることができません (Figure 2 の左図)。つまり、運動エネルギーの利得はないのです。逆に、最近接格子点の電子のスピンが、その電子のスピンと逆方向を向いていれば、同じ格子点を二電子が占有することによる Coulomb エネルギーの損こそありますが、運動エネルギーの利得があることになります (Figure 2 の右図)。

Coulomb エネルギーの損をしてでも運動エネルギーの利得を求める — 『損して得取れ』のようなこの過程を摂動過程と考えると、一度、同じ格子点の二重占有というエネルギー

¹⁴ 本章では、記述を平易にするために、学術的には正確でない術語を用いることがある。

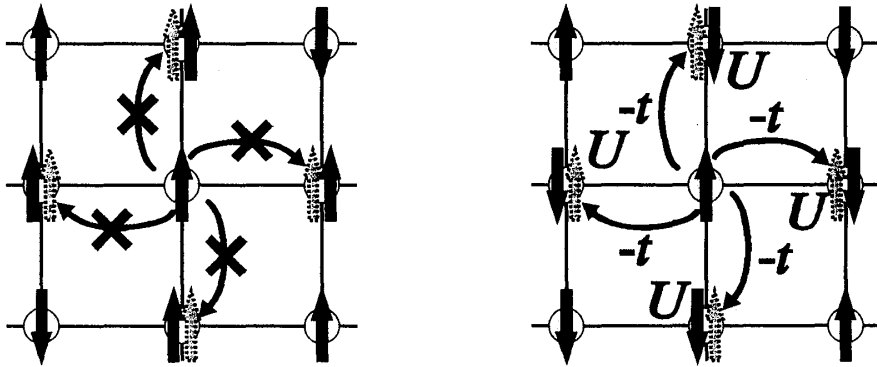


Figure 2: 運動エネルギーの利得が不可能なスピン配置（左）と可能なスピン配置（右）

ギーの高い状態を経て、再び、元の状態と同じエネルギーの状態に戻るという二次の過程によって、格子点のスピン間に有効相互作用が生まれることがわかります。このようなスピン間相互作用を運動交換（kinetic exchange）相互作用と呼びます¹⁵。数学的には、式(4)において、ハーフフィリングの場合に、第一項を摂動項として扱った有効ハミルトニアンが、相互作用 $J = 2t^2/U > 0$ を持つ反強磁性 Heisenberg モデル

$$\mathcal{H} = 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right) \quad (8)$$

で表されることに対応します（ \mathbf{S}_i はサイト i における大きさ $\frac{1}{2}$ のスピン演算子）¹⁶。

上述のエネルギー利得を全系で考えれば、全ての隣り合う格子点の電子のスピンが互いに逆向きになった時、少しでも動きたがる電子の「要求」が満たされて、運動エネルギーの利得が最大になります。これは、磁性としては、反強磁性状態と呼ばれる磁気秩序状態に対応します（Figure 3 参照）¹⁷。

以上のことからわかるように、Mott 転移では、系は、Pauli 常磁性を示す金属状態から、反強磁性を示す絶縁体状態に転移するという、電気伝導的にも磁性的にも劇的な変化が起こります。電子相関が特異な物性を引き起こす顕著な例の一つです。変化が劇的であることは、その数学的記述が困難であることと表裏一体であって、磁氣的転移まで含めて誰もが納得する形で Mott 転移を記述することは、現在でも、未解決の問題です。

¹⁵ 遷移金属酸化物をはじめとする、Mott 絶縁体と考えられる遷移金属化合物では、陰イオンを介して磁性イオンのスピン間に同様の交換相互作用が生じる。これを超交換（super exchange）相互作用と呼ぶ。

¹⁶ 有効ハミルトニアンの導出は、[2] や [4] に詳しい。

¹⁷ このように素朴に考えた古典的な状態は、ハミルトニアンの固有状態にはなっていない（Néel 状態）。本当は、量子力学的に正しい固有状態を構成する必要があるが、現在でも、二次元以上の反強磁性 Heisenberg モデルの厳密な固有状態の構成は成功していない。

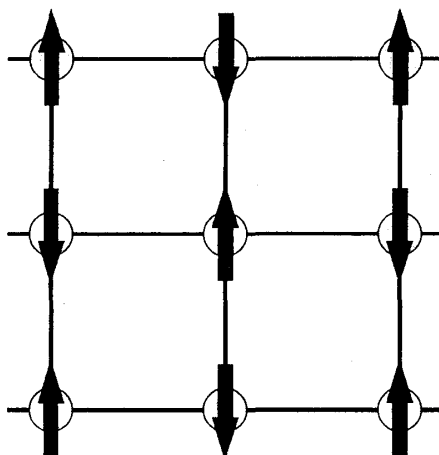


Figure 3: 二次元正方格子上的 Néel 状態

5.2 銅酸化物高温超伝導体

一例として挙げた、正方格子上的 Hubbard モデルですが、実は、銅酸化物高温超伝導体の超伝導の起源を議論するために用いられることもあります。1986 年に発見された高温超伝導は、典型的な強相関電子系の問題として、現在も盛んに研究されている現象の一つですが、その舞台は、銅酸化物高温超伝導体全てに含まれる、Cu と O からなる二次元面 (CuO_2 面) であることがわかっています。CuO₂ 面の電子状態を記述するためのモデルはいくつかありますが、そのエッセンスは、Cu 上の軌道をタイトバインディング近似で記述した、正方格子上的 Hubbard モデルに含まれているようです。

銅酸化物高温超伝導体では、CuO₂ 面上のキャリア濃度を変化させることで、ある限られた濃度の時にだけ超伝導が出現することが知られていますが、これらの超伝導体は、ちょうど Hubbard モデルのハーフフィリングに対応するようなキャリア濃度で、反強磁性を示す Mott 絶縁体となることがわかっています。Hubbard モデルで言えば、ハーフフィリングで U の大きい時に実現する Mott 絶縁体状態に対して、その電子数密度を変化させて、キャリアを生じさせることで実現する金属状態が、ちょうど、高温超伝導の出現する状況に対応しているのではなかろうか、ということです。

従来の超伝導では、電子は互いのスピンを打ち消し合ってペアを形成するので、磁性と超伝導は相容れないものと考えられていました。しかし、高温超伝導は、スピンが相殺し合うどころか、むしろ、全体として反強磁性となっている電子状態と密接に関連しているようなのです。上述のような特異な出自の金属状態では、電子のスピンは反強磁性的に

揃う性質を大きく損なわずにいると考えられています。これを反強磁性的スピン揺らぎと呼ぶことがあります。現在では、この反強磁性的スピン揺らぎが高温超伝導の起源と考えられており、研究が進んでいます¹⁸

5.3 金属強磁性

ハーフフィリングの Hubbard モデルは、超伝導とは異なる物性にも関連があります。詳細を述べることはできませんが、実は、 $U \rightarrow \infty$ という極限において、ハーフフィリングから一つだけ電子を抜いたという、非常に特殊な状況においては、系のスピンが全て揃う状態、即ち、強磁性状態になることが厳密に証明されています（長岡強磁性）。特殊な状況とは言え、Hubbard モデルの記述する電子状態が厳密に示されたという意味で重要です。強磁性状態の厳密証明という観点からの Hubbard モデルの研究の流れもあり、特殊な格子構造上の Hubbard モデルではありますが、長岡強磁性の他にも、強磁性状態が実現することが数学的に厳密に証明された例があります¹⁹。

Fe などの単体金属における強磁性について、状態密度の特異性が重要であること、そして、それに加えて、電子相関が本質的に重要であることは、古くから、Hubbard モデルを用いた研究により、明らかにされています [17, 18, 19]。しかし、金属強磁性における電子相関効果についてはまだ完全には解明されておらず、現在も、金属強磁性の研究の基本的な理論モデルとして、Hubbard モデルやその拡張されたモデルが用いられています。

5.4 不良金属

上述のように、強相関電子系の特異な物性を研究する「最初の一步」として、Hubbard モデルを対象にすることが多々あります。それは、単純なモデルでありながら、強相関電子系のエッセンスを内在しているからだということがおわかり頂けたことと思います。

たとえば、我田引水になりますが、不良金属と呼ばれる特異な金属状態での特徴的な物性を研究する際に、筆者らは、Hubbard モデルを用いて解析を行いました [20]。通常の金属では、伝導電子の平均自由行程は陽イオンの格子間隔よりも十分長くなっています。逆に、単純に考えると、電子の平均自由行程が格子間隔よりも短くなってしまうような伝導状態はあり得ないので、そのような電気伝導の限界の値に対応する電気抵抗の限界値があると考えられます。この限界を Ioffe-Regel (IR) 限界、または Mott 限界と呼びますが、

¹⁸ この部分について、最新研究の現状を正確に伝えるのは、筆者の手に余るので、他の書物を参考にされたい [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15]。

¹⁹ Hubbard モデルの強磁性についてのわかりやすい説明は [16] を参照のこと。

銅酸化物高温超伝導体など、強相関電子系と考えられるいくつかの物質では、温度が上昇するに連れて電気抵抗が増大し、このIR 限界に対応する値を越えても増大し続けるような例が報告されています。このような特異な金属状態を不良金属と呼んでいます [21].

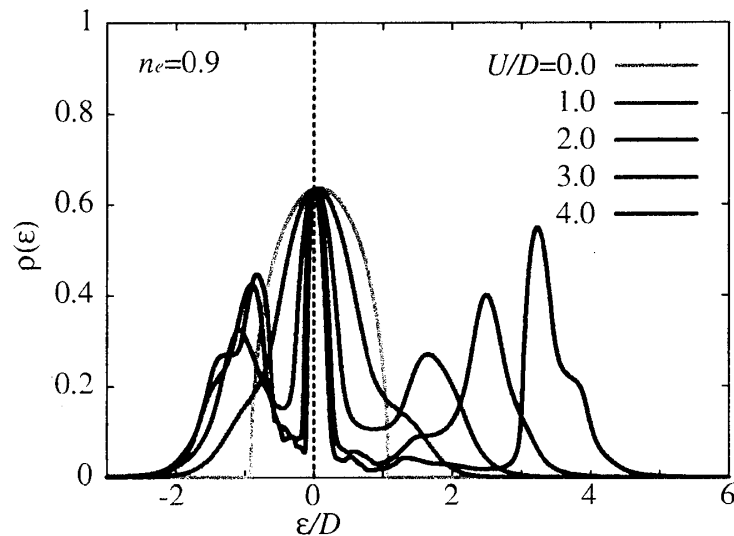


Figure 4: ハーフフィリングから外れた場合 ($n_e = 0.9$) の状態密度の U 依存性. $U = 0$ でのバンド幅を $2D$ としている.

詳細は省きますが、この不良金属に対応する状態を実現するようなパラメータの Hubbard モデルを DMFT で扱った結果を紹介しておきます。図は、状態密度の U 依存性ですが、ハーフフィリングから外れた電子数密度で計算をしているので、かなり大きな U (ハーフフィリングならば Mott 転移を起こしている程度に大きい U) に対しても、金属状態が実現していることを示しています²⁰。

6 おわりに

Hubbard モデルで記述されると考えられる強相関電子系の特異な物性を見てきました。実に簡単なハミルトニアンで表されるモデルであるにもかかわらず、モデルに内在する物理がいかにも豊富であるかを実感して頂けたのではないのでしょうか。もちろん、ここで紹介した「特異な物性」は、最先端の研究対象の極一部に過ぎません。また、将来、この単純なハミルトニアンやその拡張から、さらに奇妙で不思議な物理が現れないとも限りません。

²⁰ この特異な金属状態の DMFT での記述が的確か否かの検討も必要であろう。

Hubbard モデルに内在する物理が豊かな理由は何か — それに正確に答えることはできませんが、遍歴性と局在性の競合、または、量子力学の基本にある、波動性と粒子性の二重性を、最も単純化して、洗練された形で含んでいるからだと言えるでしょう。モデルの単純さ故の物理の多様さ、物理の多様さ故の面白さ、それが、強相関電子系の面白さであり、Hubbard モデルに含まれるエッセンスかもしれません。

References

- [1] N. W. アシュクロフト, N. D. マーミン (松原・町田共訳):「固体物理の基礎 (上・I)」(吉岡書店, 1981 年) .
- [2] 斯波弘行:「固体の電子論」(丸善, 1996 年) .
- [3] 芳田奎:「磁性」(岩波書店, 1991 年) .
- [4] 永長直人:「電子相関における場の量子論」(岩波書店, 1998 年) .
- [5] J. Hubbard: Proc. Roy. Soc. (London) **A276**, 238 (1963).
- [6] N. F. モット (小野・大槻共訳):「金属と非金属の物理」(丸善, 1996 年) .
- [7] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg: Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [8] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg, and G. Kotliar: Phys. Rev. Lett. **70**, 1666 (1993).
- [9] 斯波弘行:「新物理学選書 電子相関の物理」(岩波書店, 2001 年) .
- [10] 山田耕作:「岩波講座 物理の世界 物質科学入門 3 凝縮系における場の理論 フェルミ液体から超伝導へ」(岩波書店, 2002 年) .
- [11] 斯波弘行:「岩波講座 物理の世界 物質科学入門 4 相互作用する電子」(岩波書店, 2003 年) .
- [12] 三宅和正:「岩波講座 物理の世界 物質科学入門 5 重い電子とは何か 電子相関の物理」(岩波書店, 2002 年) .
- [13] 守谷亨:「物理の考え方 1 磁性物理学」(朝倉書店, 2006 年) .

- [14] 伊達宗行 (監修): 「大学院物性物理 2 強相関電子系」(講談社, 1997 年).
- [15] 黒木和彦・青木秀夫: 「多体電子論 II 超伝導」(東京大学出版会, 1999 年).
- [16] 草部浩一・青木秀夫: 「多体電子論 I 強磁性」(東京大学出版会, 1998 年).
- [17] J. Kanamori: Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963).
- [18] J. Hubbard: Proc. Roy. Soc. London **A276**, 238 (1964).
- [19] M. C. Gutzwiller: Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963); Phys. Rev. **134**, A923 (1964);
Phys. Rev. **137**, A1726 (1965).
- [20] T. Mutou and H. Kontani: Phys. Rev. **B74**, 115107 (2006).
- [21] 竹中康司: 日本物理学会誌 **57**, 822 (2002).